



شبیه‌سازی اثر جنس نقاط کوانتومی بر طیف جذب و مشخصه‌های سلول‌های خورشیدی حساس شده با نقاط کوانتومی

حسین وحید دستجردی، حمیدرضا فلاح و مرتضی حاجی محمودزاده

گروه فیزیک - دانشگاه اصفهان

چکیده - در این پژوهش ما تاثیر استفاده از نقاط کوانتومی مختلف به عنوان حساس کننده در سلول‌های خورشیدی حساس شده با نقاط کوانتومی را مورد بررسی قرار دادیم و نمودار طیف جذب، نمودار چگالی جریان- ولتاژ و مشخصه‌های مربوط به آن را به دست آوردیم. سپس تاثیر استفاده از دو نوع نقاط کوانتومی مختلف در یک سلول خورشیدی را مورد بررسی قرار دادیم و مشاهده کردیم استفاده از دو نوع حساس کننده که هر کدام در قسمتی از ناحیه‌ی طیفی، جذب خوبی دارند؛ می‌تواند بازده تبدیل توان سلول را به مقدار قابل ملاحظه‌ای نسبت به زمانی که هر کدام از این دو نوع حساس کننده به تنهایی به کار برده می‌شوند، افزایش دهد.

کلید واژه- بازده تبدیل توان، حساس کننده، سلول خورشیدی حساس شده با نقاط کوانتومی، طیف جذب، نقاط کوانتومی.

Simulation of the effect of quantum dots type on the absorption spectrum and characteristics of quantum dot sensitized solar cells

Hossein Vahid Dastjerdi, Hamidreza Fallah, Morteza Hajimahmoudzadeh

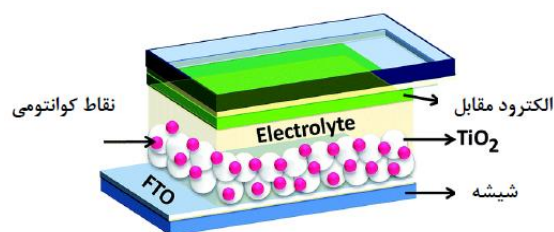
Department of Physics, University of Isfahan

Abstract- In this study, we investigated the effect of using different quantum dots as sensitizers in quantum dot sensitized solar cells and we obtained the absorption diagrams, current density- voltage diagrams and related characteristics. Then we study the effect of using two different types of quantum dots in a solar cell and we observed using two types of sensitizers that each one absorbs specific parts of solar spectrum, can increase the power conversion efficiency of the cell.

Keywords: power conversion efficiency, sensitizer, quantum dot sensitized solar cell, absorption spectrum, quantum dots.

۱- مقدمه

با افزایش نیاز بشر به انرژی و محدود بودن منابع سوخت‌های فسیلی، منابع انرژی تجدیدپذیر و قابل اعتماد از جمله انرژی خورشیدی مورد توجه ویژه پژوهشگران قرار گرفته‌اند [۱]. در میان سلول‌های خورشیدی، سلول‌های خورشیدی حساس شده با نقاط کوانتومی به دلیل خواص ویژه‌ای که دارند مانند جذب زیاد نور، سنتز آسان، هزینه‌ی تولید کم، تولید چند اکسیتون (جفت الکترون-حفره) در اثر جذب تک فوتون و هم‌چنین با توجه به اینکه گاف انرژی آن‌ها توسط اندازه‌ی آن‌ها قابل کنترل می‌باشد تا بتوان ناحیه‌ی جذبشان را بر ناحیه‌ی مورد نظر طیف خورشیدی منطبق کرد، نمونه‌ی امیدبخشی از سلول‌های خورشیدی نسل سوم بوده‌اند [۲]. پیکربندی این سلول‌ها شبیه سلول‌های خورشیدی رنگدانه‌ای شامل لایه‌ای از نانوذرات TiO_2 متخلخل، حساس کننده، الکترولیت و الکترودها می‌باشد و تنها تفاوت آن‌ها در نوع حساس کننده (نقاط کوانتومی یا رنگ) می‌باشد [۳]. با جذب نور توسط نقاط کوانتومی، اکسیتون‌ها تولید شده و با انتقال الکترون‌ها به آند TiO_2 ، فوتوجریان شکل می‌گیرد [۴]. در شکل ۱ ساختار کلی این نوع سلول‌های خورشیدی نشان داده شده است.



شکل ۱: ساختار سلول‌های خورشیدی حساس شده با نقاط کوانتومی

در این پژوهش ما با شبیه‌سازی سلول‌های خورشیدی حساس شده با نقاط کوانتومی با استفاده از روش تفاضل محدود حوزه‌ی زمان (FDTD)، جذب نور در ناحیه‌ی فعال این نوع سلول‌ها محاسبه کرده و سپس با حل معادلات دریفیت - دیفیوژن برای این سلول‌ها با استفاده از نتایج حاصل از شبیه‌سازی اپتیکی، توانستیم مشخصه‌های الکتریکی آن‌ها را استخراج نماییم.

۲- روش شبیه‌سازی

در روش FDTD با حل معادلات ماکسول، میدان‌های الکتریکی (\vec{E}) و مغناطیسی (\vec{H}) را که ابتدا توابع پیوسته‌ای از زمان هستند گسسته کرده و میدان‌ها را در زمان $n\Delta t$ که به طور اختصار با n نمایش می‌دهیم توسط روابط پله-زمانی (۱) و (۲) به دست می‌آوریم [۵].

$$\vec{E}^{(n+1)} = \vec{E}^{(n)} + \frac{\Delta t}{\epsilon} \vec{\nabla} \times \vec{H}^{(n+\frac{1}{2})} \quad (1)$$

$$\vec{H}^{(n+\frac{3}{2})} = \vec{H}^{(n+\frac{1}{2})} - \frac{\Delta t}{\mu} \vec{\nabla} \times \vec{E}^{(n+1)} \quad (2)$$

در این رابطه ϵ گذردهی الکتریکی و μ نفوذپذیری مغناطیسی می‌باشد. با داشتن روابط (۱) و (۲) و با در اختیار داشتن میدان الکتریکی اولیه ($\vec{E}^{(0)}$) می‌توان مقدار نهایی میدان‌های الکتریکی و مغناطیسی را محاسبه نمود. برای محاسبه‌ی توان جذب شده توسط سلول بر واحد حجم در هر بسامد نیز می‌توان از رابطه‌ی (۳) استفاده کرد. برای محاسبه‌ی آن تنها لازم به دانستن شدت میدان الکتریکی و قسمت موهومی گذردهی الکتریکی ماده‌ی مورد نظر می‌باشیم، که در شبیه‌سازی به روش FDTD به سادگی قابل محاسبه می‌باشند [۵].

$$P_{\text{abs}}(r, \omega) = -0.5 \times \omega |E|^2 \text{Im}(\epsilon) \quad (3)$$

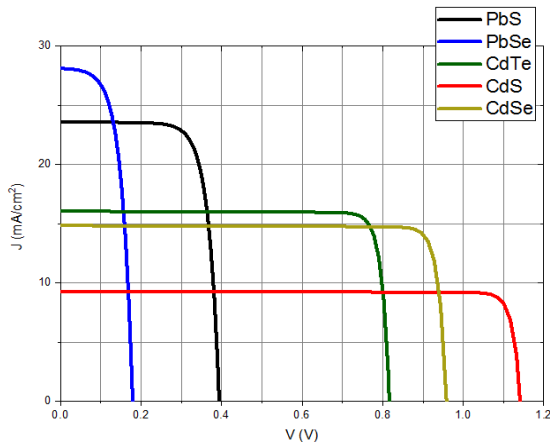
با استفاده از توان جذب شده می‌توان نرخ تولید الکترون-حفره‌ها را با استفاده از معادله‌ی (۴) دست آورد [۵].

$$G(r) = \int \frac{P_{\text{abs}}}{\hbar\omega} d\omega \quad (4)$$

سرانجام با حل معادلات دریفیت-دیفیوژن برای حامل‌ها که به صورت جدا برای الکترون‌ها و حفره‌ها توسط روابط (۵) و (۶) داده می‌شوند، با در نظر گرفتن معادلات پیوستگی، نرخ تولید و نرخ بازترکیب برای هر کدام از حامل‌ها، می‌توان نمودار جریان ولتاژ سلول‌های خورشیدی را به دست آورد [۶].

PbS و PbSe علی‌رغم جذب نور بسیار خوب، ولی به دلیل کم بودن گاف انرژی که دارند، V_{OC} پایینی دارند.

سایر نقاط کوانتومی که اثر آنها نیز شبیه‌سازی شده است به دلیل بیش‌تر بودن گاف انرژی آنها و در نتیجه جمع‌آوری الکترون‌ها با انرژی بیش‌تر، موجب بالا بودن V_{OC} برای این سلول‌ها شده است.



شکل ۳: نمودار چگالی جریان- ولتاژ

همان‌گونه که در جدول ۱ از نتایج حاصل از مشخصه‌یابی سلول‌های خورشیدی شبیه‌سازی شده پیداست، بازده تبدیل توان در صورت استفاده از نقاط کوانتومی CdSe بیشترین مقدار (۱۲/۵۱٪) خود را در بین این سلول‌ها داراست.

جدول ۱: نتایج حاصل از مشخصه‌یابی نمودار چگالی جریان- ولتاژ

حساس‌کننده	J_{SC} (mA/cm ²)	V_{OC} (V)	FF	η (%)
PbS	۲۳/۶	۰/۳۹	۰/۸۴	۷/۷۳
PbSe	۲۸/۱	۰/۱۸	۰/۶۱	۳/۰۸
CdS	۹/۳	۱/۱۴	۰/۹	۹/۵۴
CdSe	۱۴/۸	۰/۹۵	۰/۸۹	۱۲/۵۱
CdTe	۱۶/۱	۰/۸۲	۰/۸۸	۱۱/۶۲

در صورت استفاده از دو نوع نقطه کوانتومی می‌توان میزان جذب و بازدهی سلول خورشیدی را توسط دو ماده کنترل کرد. برای مثال در صورت استفاده از دو نوع حساس‌کننده CdS/PbSe (شکل ۴)، می‌توان جذب سلولی که در آن از نقاط کوانتومی CdS استفاده شده بود و در نمودار شکل ۲ نشان دادیم دارای جذب مناسبی برای طول موج‌های بلندتر

$$J_n = q\mu_n nE + qD_n \nabla n \quad (5)$$

$$J_p = q\mu_p pE - qD_p \nabla p \quad (6)$$

در این معادلات، q بار الکترون، μ_n و μ_p به ترتیب تحرک‌پذیری الکترون و حفره، n و p به ترتیب چگالی الکترون‌ها و حفره‌ها، E میدان الکتریکی، D_n و D_p به ترتیب ضریب دیفیوژن الکترون‌ها و حفره‌ها می‌باشند. از روی نمودار چگالی جریان- ولتاژ مربوط به سلول‌های خورشیدی به ترتیب توسط رابطه‌ی (۷) و (۸) می‌توان ضریب پرشدگی و بازده تبدیل توان را محاسبه نمود [۶].

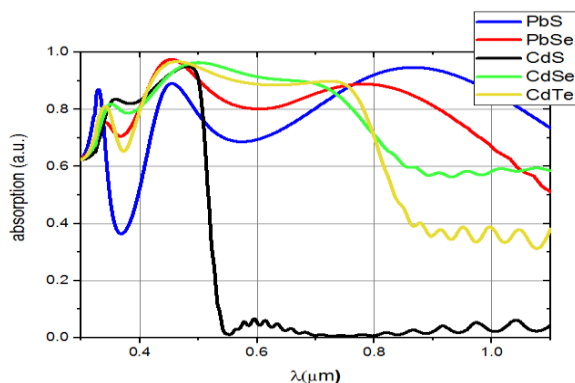
$$FF = \frac{P_{max}}{J_{SC} V_{OC}} \quad (7)$$

$$\eta = \frac{J_{SC} V_{OC} FF}{P_{solar}} \quad (8)$$

که P_{max} ، بیشینه چگالی توان دریافتی از سلول، V_{OC} ولتاژ مدار- باز و J_{SC} چگالی جریان اتصال- کوتاه می‌باشد. P_{solar} شدت نور فرودی خورشید (100 mW/cm²) برای استاندارد AM 1.5 می‌باشد.

نتایج شبیه‌سازی

شکل ۲ طیف جذب در ناحیه‌ی طول موجی ۳۰۰ تا ۱۱۰۰ نانومتر را برای سلول‌های خورشیدی حساس‌شده با نقاط کوانتومی مختلف نشان می‌دهد. از میان این نانومواد، PbS و PbSe به دلیل این‌که باند جذب را به سمت ناحیه‌ی فرورسوخ توسعه می‌دهند، می‌توانند نرخ تولید الکترون- حفره را تا حد زیادی افزایش دهند. همین امر سبب افزایش چگالی جریان برای سلول‌های ساخته‌شده توسط این مواد شده است (جدول ۱).



شکل ۴: طیف جذب سلول ناحیه‌ی فعال سلول خورشیدی

اما همان‌طور که در شکل ۳ نمودار چگالی جریان- ولتاژ مربوط به این سلول‌ها قابل مشاهده است، نقاط کوانتومی

۱۰/۴	۰/۸۶	۰/۶۴	۱۸/۸	CdS/PbSe
۱۴/۳۴	۰/۸۷	۰/۷۹	۲۰/۹	CdSe/PbS

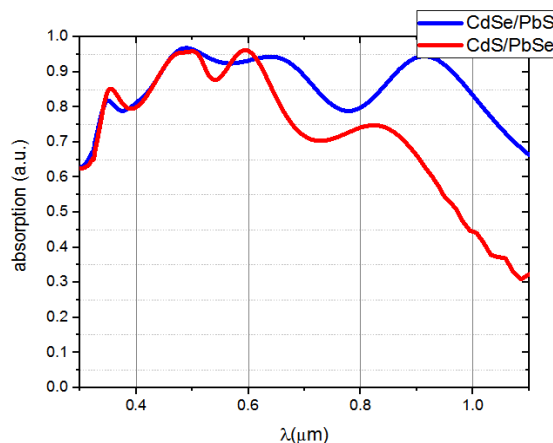
نتیجه‌گیری

با توجه به بازدهی بالایی که برای سلول‌های خورشیدی حساس شده با نقاط کوانتومی پیش‌بینی می‌شود، این سلول‌ها می‌توانند در آینده با بهبود هر چه بیشتر بازدهی، جایگزین مناسبی سلول‌های خورشیدی سیلیکونی باشند. در سلول‌های خورشیدی حساس شده با نقاط کوانتومی با استفاده از دو نوع حساس‌کننده‌ی مختلف که یکی از آن‌ها از میان عناصر PbSe و PbS انتخاب شود تا بتواند با گسترش محدوده‌ی جذب به ناحیه‌ی فرورسرخ نرخ تولید حامل‌ها را افزایش دهد و دیگری از عناصری با گاف انرژی بیشتر از ۱eV انتخاب شود تا بتواند علاوه بر افزایش جذب در ناحیه‌ی طول موج‌های کوتاه‌تر، V_{OC} سلول را بهبود بخشد، می‌توان به بازدهی‌های بسیار بیشتر از سلول‌های خورشیدی حساس شده با یک نوع نقاط کوانتومی دست یافت.

مراجع

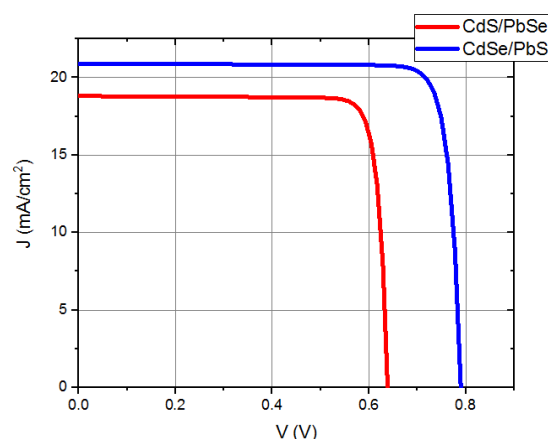
- [1] Devabhaktuni, Vijay, et al. "Solar energy: Trends and enabling technologies." *Renewable and Sustainable Energy Reviews* 19 (2013): 555-564.
- [2] Lee, Yuh-Lang, and Yi-Siou Lo. "Highly efficient quantum-dot-sensitized solar cell based on co-sensitization of CdS/CdSe." *Advanced Functional Materials* 19.4 (2009): 604-609.
- [3] Hanna, M. C., and A. J. Nozik. "Solar conversion efficiency of photovoltaic and photoelectrolysis cells with carrier multiplication absorbers." *Journal of Applied Physics* 100.7 (2006): 074510.
- [4] Lee, Ji-Won, et al. "Electron injection from a cds quantum dot to a tiO2 conduction band as an efficiency limiting process: Comparison of qd depositions between silar and linker assisted attachment." *Journal of Photopolymer Science and Technology* 29.3 (2016): 357-362.
- [5] Gross, P. A., et al. "Theoretical and photo-electrochemical studies of surface plasmon induced visible light absorption of Ag loaded TiO2 nanotubes for water splitting." *Applied Physics Letters* 109.15 (2016): 153903.
- [6] Luque, Antonio, and Steven Hegedus, eds. *Handbook of photovoltaic science and engineering*, P. 63-91, John Wiley & Sons, 2011.

از ۶۰۰ نانومتر نیست، بهبود ببخشیم. همچنین سلول خورشیدی حساس شده با دو نوع نقطه کوانتومی CdSe/PbS با داشتن جذب بسیار بالا سرتاسر ناحیه‌ی ۳۰۰ تا ۱۱۰۰ نانومتر، نرخ تولید جفت الکترون-حفره بالایی را دارا می‌باشد و با توجه به مشخصه‌های جدول ۲ بازدهی بالاتری نسبت به سایر سلول‌های بررسی شده را دارا می‌باشد.



شکل ۴: طیف جذب سلول‌های خورشیدی حساس شده با دو نوع نقاط کوانتومی مختلف

با توجه به جدول ۲ می‌توان دریافت سلول حساس شده با نقاط کوانتومی CdS/PbSe دارای V_{OC} بالاتری نسبت به سلول خورشیدی حساس شده تنها با PbSe می‌باشد. شکل ۵ نمودار چگالی جریان-ولتاژ مربوط به سلول‌های حساس شده توسط دو نوع نقاط کوانتومی را نشان می‌دهد.



شکل ۵: نمودار چگالی جریان-ولتاژ

جدول ۲: نتایج حاصل از مشخصه‌یابی نمودار چگالی جریان-ولتاژ

حساس کننده	J_{SC} (mA/cm ²)	V_{OC} (V)	FF (%)	η (%)
------------	-----------------------------------	-----------------	--------	---------------